Title	トレース不等式とその応用について (独立性と従属性の数理 : 函数解析学の視点から)
Author(s)	古市, 茂
Citation	数理解析研究所講究録 (2012), 1819: 22-34
Issue Date	2012-12
URL	http://hdl.handle.net/2433/194636
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

数理解析研究所講究録
第 1819 巻 2012 年 22-34

トレース不等式とその応用について

日本大学 文理学部 情報システム解析学科
古市　茂 (Shigeru Furuichi)
Department of Computer Science and System Analysis,
College of Humanities and Sciences,
Nihon University

1　はじめに

まず，本原稿で用いる表記法について記す．複素数体 $\mathbb{C}$ 上の全ての $n\times n$ 行列の全体を $M(n,\mathbb{C})$ で表す．全ての $n\times n$ エルミート行列の全体，及び，非負行列（半正定値行列）の全体をそれぞれ，$M_h(n,\mathbb{C})$，及び $M_+(n,\mathbb{C})$ で表す．ここで，$X\in M_+(n,\mathbb{C})$ は任意のベクトル $|\phi\rangle\in\mathbb{C}^n$ に対して $\langle\phi|X|\phi\rangle\geq 0$ となることを意味する．本講演の最初の目的は，論文 [1] で与えられた非常に興味深い次の予想に答えることである．

予想 1 **([1])** $X,Y\in M_+(n,\mathbb{C})$ 及び $p\in\mathbb{R}$ に対して，次の不等式は成り立つか否か？

(i) $Tr[(I+X+Y+Y^{1/2}XY^{1/2})^p]\leq Tr[(I+X+Y+XY)^p]$ *for* $p\geq 1$.

(ii) $Tr[(I+X+Y+Y^{1/2}XY^{1/2})^p]\geq Tr[(I+X+Y+XY)^p]$ *for* $0\leq p\leq 1$.

ここで，注意として，行列 $I+X+Y+XY=(I+X)(I+Y)$ は一般に半正定値では（エルミートですら）ないが，これは，$(I+X)^{1/2}(I+Y)(I+X)^{1/2}$ と同じ固有値を持つので，表記 $Tr[(I+X+Y+XY)^p]$ は常に意味をなす．

$p=1$ のときは，(i),(ii) どちらにおいても等号が成り立つことがすぐにわかる．また，$p=2$ の場合は，直接的な計算により論文 [2] で，その成立が示されている．

今，$T=(I+X)^{1/2}$ と $S=Y^{1/2}$ と置くと，$Tr[(I+X+Y+XY)^p]=Tr[(T^2+T^2S^2)^p]=Tr[(T^2(I+S^2))^p]=Tr[(T(I+S^2)T)^p]=Tr[(T^2+TS^2T)^p]$ により，予想 1 は次の問題に変形できる．

問題 1 $T,S\in M_+(n,\mathbb{C})$ 及び $p\in\mathbb{R}$ に対して，次の不等式は成り立つか否か？

(i) $Tr[(T^2+ST^2S)^p]\leq Tr[(T^2+TS^2T)^p]$ *for* $p\geq 1$.

(ii) $Tr[(T^2+ST^2S)^p]\geq Tr[(T^2+TS^2T)^p]$ *for* $0\leq p\leq 1$.

2　問題 1 の解決

この問題 1 は，論文 [5] において，一般の場合（$n\times n$ 行列）に対して majorization の方法を用いて示されたが，この節では，2×2 行列の場合と 3×3 行列の場合の証明についても明記する．2×2 行列の場合は，行列成分をおいて最終的にはあるスカラー不等式により示す．3×3 行列の場合の証明は，行列不等式の証明に持ち込んで majorization を示すことになる．どちらの場合も（少しは）面白みを感じて頂けるだろうという著者の考えと，一般の場合の証明に辿り着くまでの道のりそのものであったのでここに記しておきたいと思う．

2.1 2 × 2 行列の場合

まず，問題 1 に関して次の結果を示す．

命題 1 $T, S \in M_+(2, \mathbb{C})$ と $p \in \mathbb{R}$ に対して次のトレース不等式が成り立つ．

(i) もし $p \geq 1$ ならば，$Tr[(T^2 + ST^2S)^p] \leq Tr[(T^2 + TS^2T)^p]$．

(ii) もし $0 \leq p \leq 1$ ならば，$Tr[(T^2 + ST^2S)^p] \geq Tr[(T^2 + TS^2T)^p]$．

命題 1 を示すために，次の補題を用いる．

補題 1 条件 $\alpha > \beta \geq \gamma \geq 0$ を満たす実数 α, β, γ に対して次の不等式が成り立つ．

(i) もし $p \geq 1$ ならば，$(\alpha+\beta)^p + (\alpha-\beta)^p \geq (\alpha+\gamma)^p + (\alpha-\gamma)^p$．

(ii) もし $0 \leq p \leq 1$ ならば，$(\alpha+\beta)^p + (\alpha-\beta)^p \leq (\alpha+\gamma)^p + (\alpha-\gamma)^p$．

証明：次のように関数 f をおく：$f(\beta) \equiv (\alpha+\beta)^p + (\alpha-\beta)^p - (\alpha+\gamma)^p - (\alpha-\gamma)^p$, $(\alpha > \beta \geq \gamma \geq 0)$．$p \geq 1$ のとき，$f'(\beta) = p\left\{(\alpha+\beta)^{p-1} - (\alpha-\beta)^{p-1}\right\} \geq 0$ なので，$f(x) \geq f(\gamma) = 0$ となり，これにより (i) が示される．$0 \leq p \leq 1$ のとき，$f'(\beta) = p\left\{(\alpha+\beta)^{p-1} - (\alpha-\beta)^{p-1}\right\} \leq 0$ なので，$f(x) \leq f(\gamma) = 0$ となり，これにより (ii) が示される．

■

命題 1 の証明：一般性を失うことなく

$$S = \begin{pmatrix} x & z \\ \overline{z} & y \end{pmatrix}, T = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}, \quad \left(a, b, x, y > 0,\ xy > |z|^2 > 0\right).$$

とおいて良い．2 つの半正定値行列 $T^2 + TS^2T$ と $T^2 + ST^2S$ はそれぞれ次の固有値をもつ：

$$\mu_\pm = \frac{m \pm \sqrt{m^2 - l_1}}{2}, \quad \nu_\pm = \frac{m \pm \sqrt{m^2 - l_2}}{2},$$

但し，

$$\begin{aligned} m &= a^2\left(1 + x^2 + |z|^2\right) + b^2\left(1 + y^2 + |z|^2\right), \\ l_1 &= 4\{a^2b^2(1+x^2)(1+y^2) + 2a^2b^2(1-xy)|z|^2 + a^2b^2|z|^4\}, \\ l_2 &= 4\{a^2b^2(1+x^2)(1+y^2) + (a^4 + b^4 - 2a^2b^2xy)|z|^2 + a^2b^2|z|^4\}. \end{aligned}$$

そのとき次を得る：

$$\begin{aligned} &Tr[(T^2 + TS^2T)^p] - Tr[(T^2 + ST^2S)^p] = \mu_+^p + \mu_-^p - \nu_+^p - \nu_-^p \\ &= \left(\frac{m + \sqrt{m^2 - l_1}}{2}\right)^p + \left(\frac{m - \sqrt{m^2 - l_1}}{2}\right)^p - \left(\frac{m + \sqrt{m^2 - l_2}}{2}\right)^p - \left(\frac{m - \sqrt{m^2 - l_2}}{2}\right)^p. \end{aligned}$$

ここで，$l_2 - l_1 = 4(a^2 - b^2)^2|z|^2 \geq 0$ が成り立つことがすぐに分かり，また $l_1 > 0$ も成り立つ．実際，$t \equiv |z|^2 > 0$ とおけば，$(1 - xy)^2 - (1 + x^2)(1 + y^2) = -(x + y)^2 < 0$ なので $\frac{l_1}{4a^2b^2} = t^2 + 2(1 - xy)t + (1 + x^2)(1 + y^2) > 0$ である．こうして，$l_2 \geq l_1 > 0$ は $m > \sqrt{m^2 - l_1} \geq \sqrt{m^2 - l_2} \geq 0$ を導く．この最後の不等式は，行列 $T^2 + ST^2S$ が Hermitian であることに依る．従って補題 1 において $\alpha = \frac{m}{2}$, $\beta = \frac{\sqrt{m^2-l_1}}{2}$ 及び $\gamma = \frac{\sqrt{m^2-l_2}}{2}$ とすれば，命題 1 が得られる．

■

以上により，予想 1 は 2×2 の半正定値行列に対して成り立つことが分かった．

2.2 3×3 行列の場合

次に，ここでは，問題1が 3×3 の半正定値行列に対して成り立つことを，majorization [3] の方法と行列不等式の議論に持ち込むことにより示す.（majorization については，詳しくは，例えば [3, 4] を参照せよ.）ここで，$X\in M_h(n,\mathbb{C})$ に対して，$\lambda^{\downarrow}(X)=\left(\lambda_1^{\downarrow}(X),\cdots,\lambda_n^{\downarrow}(X)\right)$ は，エルミート行列 X の固有値を次のように並べたものとする：$\lambda_1^{\downarrow}(X)\geq\cdots\geq\lambda_n^{\downarrow}(X)$. さらに，もし，$\sum_{j=1}^k x_j\leq\sum_{j=1}^k y_j\quad(k=1,\cdots,n-1)$ 及び $\sum_{j=1}^n x_j=\sum_{j=1}^n y_j$ を満たす時，$x=(x_1,\cdots,x_n)$ は $y=(y_1,\cdots,y_n)$ によって majorize されるといい，$x\prec y$ で表す.

命題 2 $S,T\in M_+(3,\mathbb{C})$ に対して次が成り立つ.

$$\lambda^{\downarrow}(T^2+ST^2S)\prec\lambda^{\downarrow}(T^2+TS^2T) \tag{1}$$

証明：$S,T\in M_+(3,\mathbb{C})$ に対して，

$$\sum_{j=1}^{3}\lambda_j(T^2+ST^2S)=\sum_{j=1}^{3}\lambda_j(T^2+TS^2T).$$

が成り立つのは明らかなので，次の2つの不等式を示せばよい.

$$\lambda_1(T^2+ST^2S)\leq\lambda_1(T^2+TS^2T) \tag{2}$$

$$\lambda_3(T^2+ST^2S)\geq\lambda_3(T^2+TS^2T) \tag{3}$$

ここで T および S は可逆であると仮定して良い. 最初に不等式 (2) を示す. それには，$\lambda_1(T^2+TS^2T)\leq 1$ ならば $\lambda_1(T^2+ST^2S)\leq 1$ であることを示せば十分である. なぜならば，不等式 (2) の両辺は T と S に関して同次性があり，その場合，T と S に任意の正定数を掛けても良いからである.

$\lambda_1(T^2+TS^2T)\leq 1$ から $T(I+S^2)T\leq I$ を得る. つまり $I+S^2\leq T^{-2}$ が成り立つ. 両辺の逆をとれば，$T^2\leq(I+S^2)^{-1}$ となり，その時，次が成り立つ.

$$\begin{aligned}ST^2S &\leq S(I+S^2)^{-1}S\\ &= S\left\{S^{-2}-S^{-2}(S^{-2}+I)^{-1}S^{-2}\right\}S\\ &= I-S^{-1}(S^{-2}+I)^{-1}S^{-1}.\end{aligned}$$

こうして

$$\begin{aligned}T^2+ST^2S &\leq I-S^{-1}(S^{-2}+I)^{-1}S^{-1}+T^2\\ &\leq I.\end{aligned} \tag{4}$$

が得られる. 実際，$I+S^2\leq T^{-2}$ から $T^{-2}-I\geq S^2$ を得て，これにより $S^{-1}(T^{-2}-I)S^{-1}\geq I$ が得られる. 故に $S^{-1}T^{-2}S^{-1}\geq S^{-2}+I$ が成り立つ. さらに，この逆をとれば，$ST^2S\leq(S^{-2}+I)^{-1}$ が成り立ち，これにより $T^2\leq S^{-1}(S^{-2}+I)^{-1}S^{-1}$ が得られる. こうして最後の不等式 (4) が得られ，$\lambda_1(T^2+ST^2S)\leq 1$ を得る. よって，不等式 (2) が示された.

次に不等式 (3) を示すのに，上と同様の手法を用いる. つまり，$\lambda_3(T^2+TS^2T)\geq 1$ ならば $\lambda_3(T^2+ST^2S)\geq 1$ であることを示せばよい. $\lambda_3(T^2+TS^2T)\geq 1$ から $T(I+S^2)T\geq I$ を得る. つまり $I+S^2\geq T^{-2}$ が成り立ち，この逆をとれば，$T^2\geq(I+S^2)^{-1}$ が成り立つ. その時，次が成り立つ.

$$\begin{aligned}ST^2S &\geq S(I+S^2)^{-1}S\\ &= S\left\{S^{-2}-S^{-2}(I+S^{-2})S^{-2}\right\}S\\ &= I-S^{-1}(I+S^{-2})^{-1}S^{-1}.\end{aligned}$$

こうして

$$\begin{aligned} T^2+ST^2S &\geq I+T^2-S^{-1}(I+S^{-2})^{-1}S^{-1} \\ &\geq I. \end{aligned} \tag{5}$$

が得られる．実際，$T^{-2}\leq S^2+I$ から，$T^{-2}-I\leq S^2$ を得て，これにより $S^{-1}(T^{-2}-I)S^{-1}\leq I$ が得られる．故に，$S^{-1}T^{-2}S^{-1}\leq S^{-2}+I$ が成り立ち，この両辺の逆を取れば，$ST^2S\geq(S^{-2}+I)^{-1}$ が成り立ち，これにより $T^2\geq S^{-1}(S^{-2}+I)^{-1}S^{-1}$ が得られる． こうして最後の不等式 (5) が成り立ち $\lambda_3(T^2+ST^2S)\geq 1$ が示される．よって， 不等式 (3) が示された．

■

Remark 1 上の証明で分かるように， $S,T\in M_+(n,\mathbb{C})$ に対して，次のノルム不等式が言える．

$$\left\|T^2+ST^2S\right\|_\infty\leq\left\|T^2+TS^2T\right\|_\infty,$$

但し，$\|\cdot\|_\infty$ は *operator norm (max norm)* である．

補題 2 (p.40 in [4]) $x,y\in\mathbb{R}^n$ に対して次の条件は同値である．

(i) $x\prec y$.

(ii) $Tr[f(x)]\leq Tr[f(y)]$ *for all convex functions* $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$.

この補題と命題 2 から次が得られる．

命題 3 $S,T\in M_+(3,\mathbb{C})$ と $p\in\mathbb{R}$ に対して，次のトレース不等式が成り立つ．

(i) もし $p\geq 1$ ならば，$Tr[(T^2+ST^2S)^p]\leq Tr[(T^2+TS^2T)^p]$.

(ii) もし $0\leq p\leq 1$ ならば，$Tr[(T^2+ST^2S)^p]\geq Tr[(T^2+TS^2T)^p]$.

証明： 関数 $f(x)=x^p,(p\geq 1)$ は convex であり，関数 $f(x)=x^p,(0\leq p\leq 1)$ は concave なので, 命題 2 と補題 2 から命題 3 が得られる．

■

2.3 一般の $n\times n$ 行列の場合

この問題 1 を $n\times n$ 行列の場合に解くためにも，3×3 の場合と同様に，majorization の方法を用いる．主結果を示すために補題として， Ky Fan's maximum principle から直ちに導かれる次を用いる．

補題 3 (p.35 in [4]) $A,B\in M_h(n,\mathbb{C})$ 及び，任意の $k=1,2,\cdots,n$ に対して，次が成り立つ．

$$\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(A+B)\leq\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(A)+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(B). \tag{6}$$

そのとき，つぎの定理が成り立つ．

定理 1 ([5]) $S,T\in M_+(n,\mathbb{C})$ に対して，次が成り立つ．

$$\lambda^{\downarrow}(T^2+ST^2S)\prec\lambda^{\downarrow}(T^2+TS^2T) \tag{7}$$

証明： $S,T\in M_+(n,\mathbb{C})$ に対して次を示せばよい．

$$\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+ST^2S)\le\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+TS^2T),\ k=1,2,\cdots,n-1 \tag{8}$$

なぜならば

$$\sum_{j=1}^{n}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+ST^2S)=\sum_{j=1}^{n}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+TS^2T),$$

であり，これは $Tr[T^2+ST^2S]=Tr[T^2+TS^2T]$ と同値であるからである．

補題 3 によって，$X,Y\in M_h(n,\mathbb{C})$ と 任意の $k=1,2,\cdots,n$ に対して次を得る：

$$2\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(X)\le\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(X+Y)+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(X-Y). \tag{9}$$

$X\in M(n,\mathbb{C})$ に対して，2 つの行列 XX^* と X^*X は ユニタリー同型なので $\lambda_j^{\downarrow}(XX^*)=\lambda_j^{\downarrow}(X^*X)$ であり，これにより $k=1,2,\cdots,n-1$ に対して次を得る：

$$\begin{aligned}
2\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+TS^2T) &= \sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+TS^2T)+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}(T^2+TS^2T)\\
&= \sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}((T+iTS)(T-iST))+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}((T-iTS)(T+iST))\\
&= \sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}((T-iST)(T+iTS))+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}((T+iST)(T-iTS))\\
&= \sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}\left(T^2+ST^2S+i\left(T^2S-ST^2\right)\right)\\
&\quad+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}\left(T^2+ST^2S-i\left(T^2S-ST^2\right)\right)\\
&\ge 2\sum_{j=1}^{k}\lambda_j^{\downarrow}\left(T^2+ST^2S\right),
\end{aligned}$$

ここで，$X=T^2+ST^2S$ と $Y=i(T^2S-ST^2)$ に対して不等式 (9) を用いた．こうして，不等式 (8) が得られ，定理は示される．

■

系 1 $T,S\in M_+(n,\mathbb{C})$ 及び $p\in\mathbb{R}$ に対して，次のトレース不等式が成り立つ．

(i) もし $p\ge 1$ ならば，$Tr[(T^2+ST^2S)^p]\le Tr[(T^2+TS^2T)^p]$.

(ii) もし $0\le p\le 1$ ならば，$Tr[(T^2+ST^2S)^p]\ge Tr[(T^2+TS^2T)^p]$.

系 1 の証明は，$f(x)=x^p,(p\ge 1)$ が convex であり，$f(x)=x^p,(0\le p\le 1)$ が concave であることと，補題 2 を用いることで得られる．

上で述べたように，さらに 系 1 で $T=(I+X)^{1/2}$ and $S=Y^{1/2}$ と置けば次の系を得る．

系 2 $X, Y \in M_+(n, \mathbb{C})$ 及び $p \in \mathbb{R}$ に対して，次のトレース不等式が成り立つ.

(i) もし $p \geq 1$ ならば，$Tr[(I+X+Y+Y^{1/2}XY^{1/2})^p] \leq Tr[(I+X+Y+XY)^p]$.

(ii) もし $0 \leq p \leq 1$ ならば，$Tr[(I+X+Y+Y^{1/2}XY^{1/2})^p] \geq Tr[(I+X+Y+XY)^p]$.

従って，予想 1 は肯定的に解決された.

3 得られたトレース不等式の応用（1）

系 2 を用いた応用として，半正定値行列に限定した，Golden-Thompson のトレース不等式 [6, 7] の 1 経数拡張を示す．そのために，$\nu \in (0,1]$ に対して次の一般化指数関数を定義する．もし，$Tr\left[(I+\nu X)^{\frac{1}{\nu}}\right] \in \mathbb{R}$ ならば $\exp_\nu(X) \equiv (I+\nu X)^{\frac{1}{\nu}}$ と定義する．また，次の結果を用いる.

補題 4 (**[2]**) $X, Y \in M_+(n, \mathbb{C})$ と $\nu \in (0,1]$ に対して次が成り立つ.

(i)

$$Tr[\exp_\nu(X+Y)] \leq Tr[\exp_\nu(X+Y+\nu Y^{1/2}XY^{1/2})]. \tag{10}$$

(ii)

$$Tr[\exp_\nu(X+Y+\nu XY)] \leq Tr[\exp_\nu(X)\exp_\nu(Y)]. \tag{11}$$

系 2 の (i) と補題 4 から次の命題を得る.

命題 4 (**[5]**) $X, Y \in M_+(n, \mathbb{C})$ と $\nu \in (0,1]$ に対して次が成り立つ.

$$Tr[\exp_\nu(X+Y)] \leq Tr[\exp_\nu(X)\exp_\nu(Y)]. \tag{12}$$

証明：$X_1 = \nu X$, $Y_1 = \nu Y$ and $p = \frac{1}{\nu}$ とおいて，系 2 の (i) を適用すると，不等式 (10) の右辺は 次のように上から押えられる.

$$\begin{aligned}
Tr\left[\exp_\nu(X+Y+\nu Y^{1/2}XY^{1/2})\right] &= Tr\left[\left\{I+\nu(X+Y+\nu Y^{1/2}XY^{1/2})\right\}^{\frac{1}{\nu}}\right] \\
&= Tr\left[(I+X_1+Y_1+Y_1^{1/2}X_1Y_1^{1/2})^p\right] \\
&\leq Tr\left[(I+X_1+Y_1+X_1Y_1)^p\right] \\
&= Tr\left[\{I+\nu(X+Y+\nu XY)\}^{\frac{1}{\nu}}\right] \\
&= Tr\left[\exp_\nu(X+Y+\nu XY)\right],
\end{aligned}$$

これは不等式 (11) の左辺である．従って，補題 4 により命題が示される.

■

不等式 (12) は半正定値行列 X と Y に対するある種の Golden-Thompson 不等式の 1 係数拡張になっている．(オリジナルの Golden-Thompson 不等式 [6, 7] は Hermitian に対して成り立つ．)

4 得られたトレース不等式の応用（2）

さらなる応用として，論文 [2] で示した方法をアレンジして，ある種の条件下での一般化相対エントロピー (Tsallis 相対エントロピー) の下界を導出する．一般化相対エントロピー (Tsallis 相対エントロピー) は通常の量子相対エントロピーの 1 係数拡張したものであり次で定義される.

定義 1 $X, Y \in M_+(n,\mathbb{C})$ と $\nu \in (0,1]$ に対して，一般化相対エントロピー *(Tsallis* 相対エントロピー*)* を次で定義する：

$$D_\nu(X|Y) \equiv \frac{Tr[X - X^{1-\nu}Y^\nu]}{\nu} = Tr[X^{1-\nu}(\ln_\nu X - \ln_\nu Y)]$$

ここで，X 及び Y は密度行列でないことに注意する．このように，状態空間の条件を緩めて数学的な研究をすることはしばしばある [4, 8, 9, 10, 11]．(量子系に限らず，古典系においてもしばしばある [12, 13, 14, 15]．) $D_\nu(X|Y)$ の詳細に関しては，例えば，[8] や [9] 及びそれらの参考文献を参照せよ．$D_\nu(X|Y)$ の 1 つの下界として次が示された．

命題 5 ([8]) $X, Y \in M_+(n,\mathbb{C})$ と $\nu \in (0,1]$ に対して，一般化 *Bogolivbov* 不等式が成り立つ．

$$D_\nu(X|Y) \geq \frac{Tr[X] - (Tr[X])^{1-\nu}(Tr[Y])^\nu}{\nu} \tag{13}$$

また，別の下界としては次を示すことができる．

定理 2 ([16]) $X, Y \in M_+(n,\mathbb{C})$ と $\nu \in (0,1]$ に対して，もし $I \leq Y \leq X$ ならば，次が成り立つ．

$$D_\nu(X|Y) \geq Tr\left[X^{1-\nu}\ln_\nu\left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)\right]. \tag{14}$$

この証明は前節で得られた命題 4 と次の補題を用いればよい．

補題 5 ([16]) 任意の $\nu \in (0,1]$ と任意の $d \in [0,\infty)$ に対して 次の関係が成り立つ．

(i) $A, Y \in M_+(n,\mathbb{C})$ ならば次が成り立つ．

$$d\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A + \ln_\nu Y)]}{d}\right) = \max\left\{Tr[X^{1-\nu}A] - D_\nu(X|Y) : X \geq 0, Tr[X] = d\right\}.$$

(ii) $X, B \in M_+(n,\mathbb{C})$ で $Tr[X] = d$ ならば次が成り立つ．

$$D_\nu(X|\exp_\nu(B)) = \max\left\{Tr[X^{1-\nu}A] - d\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A+B)]}{d}\right) : A \geq 0\right\}.$$

補題 5 は，相対エントロピーの変分表現 [17] の 1 係数拡張に相当するものである．

証明:$\nu = 1$ の場合は自明なので，$\nu \in (0,1)$ と仮定する．$\nu \in (0,1)$ に対して，$\lim_{x\to 0} x\ln_\nu \frac{a}{x} = 0$ なので，$X = 0$ の場合も自明なので, $X \neq 0$ と仮定する．

(1) まず，$X \in M_+(n,\mathbb{C})$, $Tr[X] = d < \infty$ に対して，次の関数を定義する：

$$F_\nu(X) \equiv Tr[X^{1-\nu}A] - D_\nu(X|Y)$$

もし Schatten 分解 $X = \sum_{j=1}^\infty \mu_j E_j$,（但し，全ての E_j, $(j = 1, 2, \cdots, \infty)$ は rank が 1 の射影であり $\sum_{j=1}^\infty E_j = I$ かつ $\mu_j \geq 0$, $(j = 1, 2, \cdots, \infty)$, $\sum_{j=1}^\infty \mu_j = d$ である）を持つならば，次のように書ける：

$$F_\nu\left(\sum_{j=1}^\infty \mu_j E_j\right) = \sum_{j=1}^\infty \left\{\mu_j^{1-\nu}Tr[E_jA] + \frac{1}{\nu}\mu_j^{1-\nu}Tr[E_jY^\nu] - \frac{1}{\nu}\mu_j Tr[E_j]\right\}.$$

そのとき，次が得られる：

$$\frac{\partial^2}{\partial\mu_j^2}F_\nu\left(\sum_{j=1}^\infty \mu_j E_j\right) = -\nu(1-\nu)\mu_j^{-\nu-1}Tr\left[E_j\left(A + \frac{1}{\nu}Y^\nu\right)\right] \leq 0,$$

これは F_ν が concave function であることを示す．こうして，$F_\nu(X)$ はある半正定値行列 X_0（但し，$Tr[X_0]=d$）で最大値を取ることが分かる．そのとき任意の Hermitian S (但し $Tr[S]=0$) に対して，(なぜならば任意の $t\in\mathbb{R}$ に対して, $Tr[X_0+tS]=d$ でありこれは, 関数 F_ν の定義域で定義された半正定値行列に対する条件である), 半正定値行列 X_0 が存在して，次を満たす：

$$0=\frac{d}{dt}F_\nu(X_0+tS)|_{t=0}=(1-\nu)Tr\left[S(X_0^{-\nu}A+\frac{1}{\nu}X_0^{-\nu}Y^\nu)\right],$$

従って，$X_0^{-\nu}A+\frac{1}{\nu}X_0^{-\nu}Y^\nu=cI$ for $c\in\mathbb{R}$. これより，$c=\frac{1}{\nu}$ とおき，条件 $Tr[X_0]=d$ を満たすように.

$$X_0=d\frac{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]}$$

を得る．公式 $\ln_\nu\frac{y}{x}=\ln_\nu y+y^\nu\ln_\nu\frac{1}{x}$ 及び $\ln_\nu\frac{1}{x}=-x^{-\nu}\ln_\nu x$ から次を得る：

$$\begin{aligned}
F_\nu(X_0) &= d^{1-\nu}\frac{Tr[\{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)\}^{1-\nu}A]}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]^{1-\nu}} \\
&\quad -d^{1-\nu}Tr\left[\frac{\{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)\}^{1-\nu}}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]^{1-\nu}}\left(\ln_\nu\left(\frac{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)}{\frac{1}{d}Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]}\right)-\ln_\nu Y\right)\right] \\
&= d^{1-\nu}\frac{Tr[\{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)\}^{1-\nu}A]}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]^{1-\nu}}-d^{1-\nu}Tr\left[\frac{\{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)\}^{1-\nu}}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]^{1-\nu}}\{A+\ln_\nu Y\right. \\
&\quad \left.+\{\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)\}^\nu\ln_\nu\left(\frac{d}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu(A+\ln_\nu Y))]}\right)-\ln_\nu Y\}\right] \\
&= -d^{1-\nu}Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]^\nu\ln_\nu\left(\frac{d}{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]}\right) \\
&= d\ln_\nu\frac{Tr[\exp_\nu(A+\ln_\nu Y)]}{d}.
\end{aligned}$$

(2) (1) の結果から，次の全ての半正定値行列全体の上で定義された関数

$$g(A)\equiv d\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A+B)]}{d}\right),\quad d\equiv Tr[X]<\infty$$

は max に関する三角不等式により convex である．今，$A_0=\ln_\nu X-B$ とし，次を定義する：

$$G_\nu(A)\equiv Tr[X^{1-\nu}A]-d\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A+B)]}{d}\right),$$

これは，半正定値行列全体の上で concave である．そのとき Hermitian S に対して，ある半正定値行列 A_0 が存在して次を満たす：

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}G_\nu(A_0+tS)|_{t=0} &= Tr[X^{1-\nu}S]-d\left(\frac{Tr[X]}{d}\right)^{\nu-1}\frac{Tr[S(I+\nu\ln_\nu X)^{\frac{1-\nu}{\nu}}]}{d} \\
&= Tr[X^{1-\nu}S]-Tr[SX^{1-\nu}]=0,
\end{aligned}$$

ここで，公式 $\frac{d}{dx}\ln_\nu(x)=x^{\nu-1}$ と $\frac{d}{dx}\exp_\nu(x)=(1+\nu x)^{\frac{1}{\nu}-1}$ を用いた．故に，$G_\nu(A)$ は最大値を取る：

$$G_\nu(A_0) = Tr[X^{1-\nu}(\ln_\nu X-B)]-d\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(\ln_\nu X-B+B)]}{d}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= Tr[X^{1-\nu}(\ln_\nu X - B)] - d\ln_\nu\left(\frac{Tr[X]}{d}\right) \\
&= Tr[X^{1-\nu}(\ln_\nu X - \ln_\nu \exp_\nu(B))] \\
&= D_\nu(X|\exp_\nu(B)).
\end{aligned}
$$

■

$d=1$ かつ $\nu \to 0$ とすれば補題 5 は論文 [17] における Lemma 2.1（但し，$A, B \in M_+(n,\mathbb{C})$ の場合）に帰着される．F.Hiai -D.Petz によって示された Umegaki relative entropy に対するオリジナルの変分表現 [17] は Hermitian A, B に対して成り立つことに注意する．こうして，定理 2 の証明を与える準備が整った．

定理 2 の証明：条件 $I \le Y \le X$（これは $A \ge 0$ 及び $B \ge 0$ を保証する）のもとで，補題 5 で $B = \ln_\nu Y$ 及び $A = \ln_\nu Y^{-1/2}XY^{-1/2}$ とおき，補題 4 を用いると次が得られる：

$$
\begin{aligned}
D_\nu(X|Y) &= D_\nu(X|\exp_\nu(\ln_\nu Y)) \\
&= D_\nu(X|\exp_\nu(B)) \\
&\ge Tr[X^{1-\nu}A] - Tr[X]\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A+B)]}{Tr[X]}\right) \\
&\ge Tr[X^{1-\nu}A] - Tr[X]\ln_\nu\left(\frac{Tr[\exp_\nu(A)\exp_\nu(B)]}{Tr[X]}\right) \\
&= Tr[X^{1-\nu}\ln_\nu Y^{-1/2}XY^{-1/2}] - Tr[X]\ln_\nu\left(\frac{Tr[Y^{-1/2}XY^{-1/2}Y]}{Tr[X]}\right) \\
&= Tr[X^{1-\nu}\ln_\nu Y^{-1/2}XY^{-1/2}].
\end{aligned}
$$

■

Remark 2 *(I)* トレース不等式 *(14)* は次と同値である：

$$
Tr\left[X^{1-\nu}\left\{X^\nu - Y^\nu + I - \left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)^\nu\right\}\right] \ge 0.
$$

従って，もし次の行列不等式

$$
X^\nu - Y^\nu + I - \left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)^\nu \ge 0 \tag{15}
$$

が成り立てば，トレース不等式 *(14)* はただちに成り立つ．しかし，行列不等式 *(15)* は一般には成り立たない．なぜならば，次の反例が存在するからである．

(i) $\nu = 1$ とし 2 つの半正定値行列を

$$
X = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},
$$

とすれば，これらは条件 *(*定理 *2* の仮定*)*$I \le Y \le X$ を満たす．そのとき，エルミート行列 $X - Y + I - Y^{-1/2}XY^{-1/2}$ の固有値の 1 つは負の値をとる．

(ii) $\nu = 1$ とし 2 つの半正定値行列を

$$
X = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}, Y = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},
$$

とすれば，これらは条件 *(*命題 *2* の仮定*)*$I \le Y \le X$ を満たす．そのとき，エルミート行列 $X - Y + I - Y^{-1/2}XY^{-1/2}$ の固有値の 1 つは負の値をとる．

(II) 我々の関心は命題 *2* の仮定に移る．命題 *2* の仮定 $I \leq Y \leq X$ が満たされていない時，トレース不等式 *(14)* の反例を見つけることができる．例えば，$\nu = 1$ とし 2 つの半正定値行列を

$$X = \frac{1}{15}\begin{pmatrix} 10 & -3 \\ -3 & 10 \end{pmatrix}, Y = \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

とすると，これらは条件 $I \leq Y \leq X$ を満たさない *(*ちなみに $0 < Y \leq X \leq I$ を満たしている*)*，そのとき次が成り立つ．

$$Tr[X - Y + I - Y^{-1/2}XY^{-1/2}] \simeq -20.9667.$$

こうしてトレース不等式 *(14)* は一般の半正定値行列 X と Y に対しては成立しないことがわかる．

(I) と *(II)* から命題 *2* は非自明な結果と結論付けても良い．

最後に 2 つの下界に対して次の Remark を与える．

Remark 3 条件 $I \leq Y \leq X$ の下で次の成立を予想しても良い．つまり，$X, Y \in M_+(n, \mathbb{C})$ と $\nu \in (0, 1]$ に対して，

$$Tr\left[X^{1-\nu} \ln_\nu \left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)\right] \geq \frac{Tr[X] - (Tr[X])^{1-\nu}(Tr[Y])^\nu}{\nu} \tag{16}$$

が成り立つか？不等式 *(16)* は次と同値である：

$$Tr\left[X^{1-\nu}\left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)^\nu\right] + (Tr[X])^{1-\nu}(Tr[Y])^\nu \geq Tr[X^{1-\nu}] + Tr[X]. \tag{17}$$

ここで次の 2 つの半正定値行列を用いる．

$$X = \begin{pmatrix} 10 & 5 \\ 5 & 5 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

これらは条件 $I \leq Y \leq X$ を満たしている．そのとき，$\nu = 0.1$ とすると

$$Tr\left[X^{1-\nu}\left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)^\nu\right] + (Tr[X])^{1-\nu}(Tr[Y])^\nu - \left(Tr[X^{1-\nu}] + Tr[X]\right) \simeq 0.508133.$$

となり，$\nu = 0.9$ とすると

$$Tr\left[X^{1-\nu}\left(Y^{-1/2}XY^{-1/2}\right)^\nu\right] + (Tr[X])^{1-\nu}(Tr[Y])^\nu - \left(Tr[X^{1-\nu}] + Tr[X]\right) \simeq -1.1696.$$

となる．すなわち不等式 *(16)* は一般には成立しない．つまり，不等式 *(13)* か不等式 *(14)* のどちらかが常に優れているとは言えない．この結果は定理 *2* が命題 *5* との比較において意味あるものであるということを支援するものである．

5 一般化相対エントロピー (Tsallis 相対エントロピー) の上界について

最後に，一般化相対エントロピー (Tsallis 相対エントロピー) の上界について幾つかの結果を述べて本稿を終える．Tsallis 相対エントロピーの上界に関して次の命題が成り立つ．

命題 6 ([8]) $X, Y \in M_+(n, \mathbb{C})$ と $\nu \in (0, 1]$ に対して次の不等式が成り立つ．

$$D_\nu(X|Y) \leq -Tr\left[X \ln_\nu \left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)\right]. \tag{18}$$

この右辺の更なる上界として，T.Furuta は次の不等式を示した [10].

$$D_\nu(X|Y) \le -Tr\left[X \ln_\nu \left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)\right] \le \left(\frac{1-K(\nu,h)}{\nu}\right) Tr[X]^{1-\nu}Tr[Y]^\nu + D_\nu(X|Y),$$

但し $X^{1/2}\ln_\nu\left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)X^{1/2}$ はしばしば Tsallis relative operator entropy と呼ばれる．また $K(\nu,h)$ は $\nu\in\mathbb{R}$ 及び $h\in(0,\infty)$, $h\neq 1$ に対して定義された一般化 Kantorovich 定数：

$$K(\nu,h) \equiv \frac{(h^\nu-h)}{(\nu-1)(h-1)}\left(\frac{(\nu-1)}{\nu}\frac{h^\nu-1}{(h^\nu-h)}\right)^\nu.$$

である．ここで $K(0,h)=K(1,h)=1$ 及び $\frac{dK(\nu,h)}{d\nu}|_{\nu=0} = -\log S(h)$ が成り立つので，上の不等式は極限 $\nu\to 0$ を取れば次の不等式に帰着される．(下の左辺の不等式は，もともと F.Hiai-D.Petz によって得られてものである [17]．)：

$$U(X|Y) \le -Tr\left[X\log\left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)\right] \le Tr[X]\log S(h) + U(X|Y),$$

但し，$U(X|Y) \equiv Tr[X(\log X - \log Y)]$ H.Umegaki によって導入された相対エントロピーであり [18]，$X^{1/2}\log\left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)X^{1/2}$ は relative operator entropy である [19, 20]．また，$S(h) \equiv \frac{h^{\frac{1}{h-1}}}{e\log h^{\frac{1}{h-1}}}$ は Specht's ratio [21] と呼ばれる．Specht's ratio の性質などについて入手しやすい文献として，最近書いた拙文 [22] を挙げておく．その原稿に記した参考文献も参照されたい．

命題 6 とは異なる上界として，次の命題を示すことも出来る．

命題 7 **([16])** $X,Y\in M_+(n,\mathbb{C})$ と $\nu\in(0,1]$ に対して次の不等式が成り立つ．

$$D_\nu(X|Y) \le \frac{Tr[(X-Y)_+]}{\nu}, \tag{19}$$

但し $A_+ \equiv \frac{1}{2}(A+|A|)$ かつ $|A|\equiv(A^*A)^{1/2}$ である．

証明：最近，量子 Chernoff bound を証明するために，K.M.R.Audenaert et.al. によって示された不等式 [23]：

$$Tr[A^sB^{1-s}] \ge \frac{1}{2}Tr[A+B-|A-B|] \quad A,B\in M_+(n,\mathbb{C}) \textit{ and } s\in[0,1] \tag{20}$$

を用いれば直ちに証明できる．

■

上記の 2 つの命題から我々は，Tsallis relative entropy の上界として異なる 2 つの上界を持つことがわかる．自然な興味として，それらの順序に興味を持つ．つまり，$X,Y\in M_+(n,\mathbb{C})$ と $\nu\in(0,1]$ に対して次の不等式が成り立つか否か？

$$-Tr\left[X\ln_\nu\left(X^{-1/2}YX^{-1/2}\right)\right] \le \frac{Tr[(X-Y)_+]}{\nu}, \tag{21}$$

これは次と同値である：

$$Tr\left[X\sharp_\nu Y\right] \ge \frac{1}{2}Tr[X+Y-|X-Y|], \tag{22}$$

但し，$X\sharp_\nu Y \equiv X^{1/2}(X^{-1/2}YX^{-1/2})^\nu X^{1/2}$ は ν-power mean である．ここで，不等式 (18) から次が成り立つことに注意する．

$$Tr[X^{1-\nu}Y^\nu] \ge Tr\left[X\sharp_\nu Y\right]$$

しかし，不等式 (22) に関して次の反例が成り立つ．$\nu = 1/2$ とし

$$X = \begin{pmatrix} 10 & 7 \\ 7 & 5 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 16 & 6 \\ 6 & 3 \end{pmatrix}$$

とすると

$$Tr\,[X\natural_\nu Y] - \frac{1}{2}Tr[X + Y - |X - Y|] \simeq -0.510619$$

となり，一般に，不等式 (21) は成り立たない．すなわち，2つの不等式 (18) または (19) のどちらかが常に良いとは必ずしも言えない．

謝辞　本研究は，日本学術振興会科学研究費補助金（若手研究 (B)，課題番号 20740067）の助成を受けている．

References

[1] S.Furuichi,A mathematical review of the generalized entropies and their matrix trace inequalities, Proceedings of WEC2007, pp.840-845 (2007).

[2] S.Furuichi, Trace inequalities in nonextensive statistical mechanics, Linear Alg.Appl., Vol.418(2006), pp.821-827.

[3] A.W.Marshall and I.Olkin, Inequalities: Theory of majorization and its applications, Academic Press, 1979.

[4] R.Bhatia, Matrix Analysis, Springer, 1997.

[5] S.Furuichi and M.Lin, A matrix trace inequality and its application, Linear Alg, Appl.,Vol.433(2010), pp.1324-1328.

[6] S.Golden, Lower bounds for the Helmholtz function, Phys. Rev., Vol.137(1965), pp.B1127-B1128.

[7] C.J.Thompson, Inequality with applications in statistical mechanics, J.Math.Phys., Vol.6(1965), pp.1812-1813.

[8] S.Furuichi, K.Yanagi and K.Kuriyama, Fundamental properties of Tsallis relative entropy, J.Math.Phys., Vol.45(2004), pp.4868-4877.

[9] S.Furuichi, K.Yanagi and K.Kuriyama, A note on operator inequalities of Tsallis relative opeartor entropy, Linear Alg. Appl.,Vol.407(2005), pp.19-31.

[10] T.Furuta, Reverse inequalities involving two relative operator entropies and two relative entropies, Linear Alg.Appl., Vol. 403(2005), pp. 24-30.

[11] W. Kumagai, A characterization of extended monotone metrics, Linear Alg. Appl.,Vol.434(2011),pp.224-231.

[12] J.Aczél and Z.Daróczy, On measures of information and their characterizations, Academic Press, 1975.

[13] S.Amari, α-divergence is unique, belonging to both f-divergence and Bregman divergence classes, IEEE, Trans.IT, Vol.55(2009),pp.4925-4931.

[14] A.Cichocki, R.Adunek, A.H.Phan and S.Amari, Nonnegative matrices and tensor factorizations, John Wiley and Sons, 2009.

[15] N.Murata, T.Takenouchi. T.Kanamori and S.Eguchi, Information geometry of U-boost and Bregman divergence, Neural Comp.,Vol.26(2004),pp.1651-1686.

[16] S.Furuichi, Inequalities for Tsallis relative entropy and generalized skew information, to appear in Linear and Multilinear algebra (Special issue on Quantum information science).

[17] F.Hiai and D.Petz, The Golden-Thompson trace inequality is complemented, Linear Alg. Appl.,Vol.181(1993), pp.153-185.

[18] H.Umegaki, Conditional expectation in an operator algebra, IV (entropy and information),Kodai Math.Sem.Rep., Vol.14(1962), pp.59-85.

[19] V.P.Belavkin and P.Staszewski, C*-algebraic generalization of relative entropy and entropy, Ann. Inst. Henri Poincaré, Sec. A, Vol.37(1982), pp.51-58.

[20] J.I.Fujii and E.Kamei, Relative operator entropy in noncommutative information theory, Math. Japonica, Vol.34(1989), pp.341-348.

[21] W.Specht, Zer Theorie der elementaren Mittel, Math.Z.,Vol.74(1960), pp.91-98.

[22] S.Furuichi, Refined Young inequalities with Specht's ratio, to appear in J.Egypt.Math.Soc.(arXiv:1004.0581v2).

[23] K.M.R.Audenaert et.al., Discriminating states: The quantum chernoff bound, Phys.Rev.Lett.,Vol.98(2007),160501.